Un peu de Calcul Scientifique.

Rodolphe Turpault

Institut de Mathématiques de Bordeaux,
Bordeaux-INP

29/01/2019

Plan de l'exposé

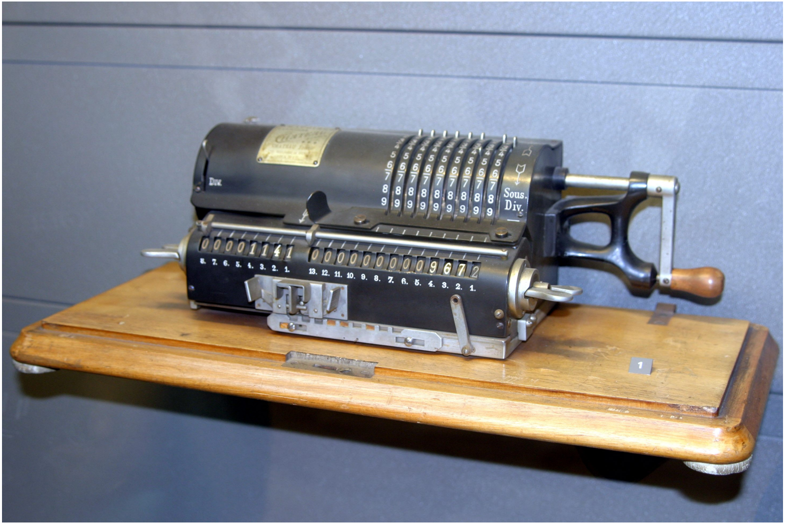
Plan

Définition

Si on respecte l'étymologie :

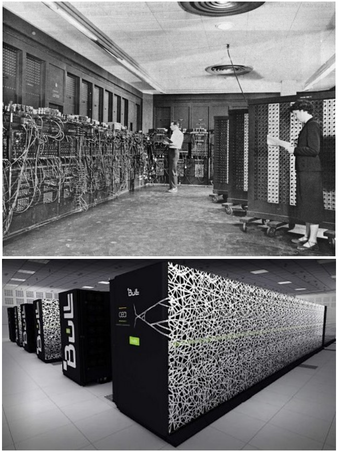
Calcul :ensemble d'opérations
Scientifique : à l'usage de la science, mais aussi avec une méthodologie scientifique.

En pratique le calcul scientifique est à la base de la *simulation numérique* et sous-entend l'utilisation de techniques permettant de faire effectuer des calculs de grande taille à des ordinateurs.



Machine à calculer "Dactyle"

Évolution des calculateurs



Calculateurs : ENIAC (1947) en h. et Terra 100 (2010) en b.

Essor

- Premières utilisations (?) : Pendant la 2nde guerre mondiale : décryptage, bombe atomique $\rightarrow$ centres de recherches nationaux
- Domaines historiques : (physiques complexes) astrophysique, mécanique des fluides ou des solides, énergétique, etc. $\rightarrow$ grands groupes industriels
- Plus récemment : biologie, médecine, etc. $\rightarrow$ PME.

Flops	1	5k	1,2 M	1 G	1 T	1 P	100P
Année	1938	1943	1961	1984	1997	2008	2016

Rem : les ordinateurs personnels d'aujourd'hui ont une puissance comparable à celle des supercalculateurs des années 1995 à 2005.

Supercalculateurs actuels

Aujourd'hui, les supercalculateurs sont constitués de grappes de processeurs.

Pour une efficacité maximale, ils s'appuient sur du calcul parallèle hybride (CPU/GPU)

Il existe également des réseaux internationaux basés sur internet (ex : BOINC - Bitcoin).

Place dans le monde scientifique

Les 3 piliers de la recherche scientifique sont désormais :

- Théorie (modélisation, analyse, analyse numérique)
- Expérience
- Simulation numérique (calcul scientifique)

Il est important (crucial) de considérer et concilier les 3.

Plan

Électrophysiologie

Ablation radiofréquence.
Simulation : S. Labarthe (IMB - Inria Bordeaux-Carmen)
Le modèle : monodomaine + modèle ionique *ad hoc*.

$$\begin{aligned} \partial_t V_m + I_{ion}(V_m, w) &= \mathrm{div}(D \nabla V_m), \\ \partial_t w &= G(Vm, w). \end{aligned}$$

Domaine : oreillettes.

Mécanique des fluides

Nage d'un poisson.
Simulation : M. Bergmann (IMB - Inria Bordeaux-Memphis)
Le modèle : Navier-Stokes incompressible + interaction fluide/structure.

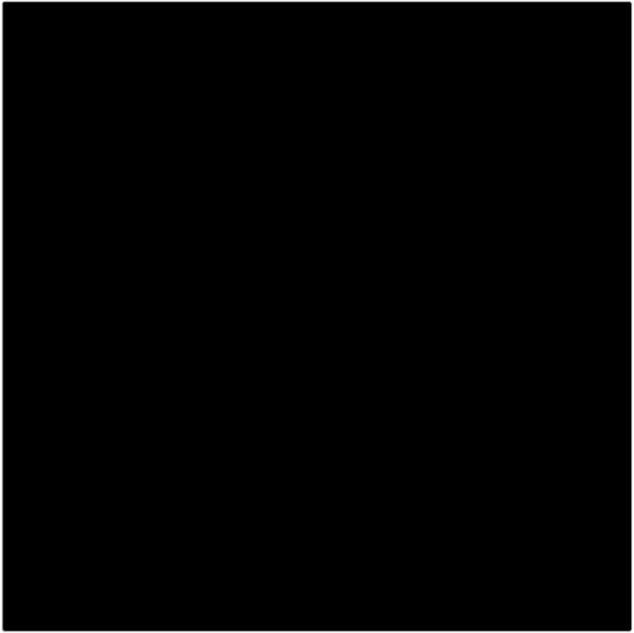
$$\partial_t V + (V \cdot \nabla)V + \frac{1}{\rho}\nabla p = \mathrm{div}(\tau(V)),$$
$$\mathrm{div}(V) = 0,$$

+Interaction fluide/structure

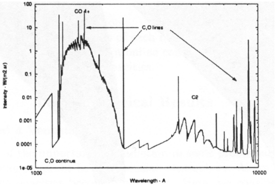
Mécanique des fluides

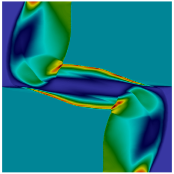
Simulation d'une explosion.
Simulation : R. Loubère (IMB - CNRS)
Le modèle : équations d'Euler

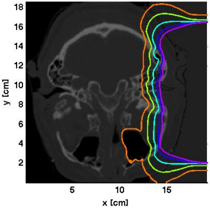
$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \mathrm{div}(\rho V) &= 0,\\ \partial_t(\rho V) + \mathrm{div}(\rho V \otimes V) + \nabla p &= 0,\\ \partial_t E + \mathrm{div}((H+p)V) &= 0\end{aligned}$$

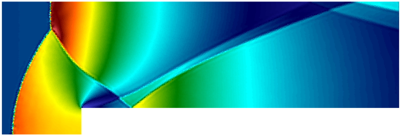


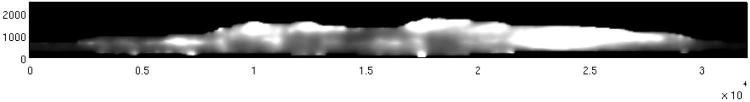
Quelques autres exemples











Plan

3 Les enjeux sur des exemples

Représentation des nombres en machine

Elle suit la norme IEEE754. Un nombre réel est codé de la manière suivante :

$$x = (-1)^s m 2^{e-d},$$

où m est la mantisse : $m = 1, a_1 a_2 \dots a_p$ et d le décalage d'exposant.

Il y a 3 standards :

Type	octets	p	d
Simple précision	4	23	127
Double précision	8	52	1023
Quadruple précision	16	112	16383

Représentation des nombres en machine

Nombre spéciaux :

- $\pm\infty$ (`INF`).
- Non représentable (`NaN`).
- ± 0 (`ZERO`).
- Nombres dénormalisés.

Représentation des nombres en machine

Un exemple sur 7 bits : p=3,

m / e	-3	-2	-1	0	1	2	3	4
$1,000$	0.	0.25	0.5	1	2	4	8	Inf
$1,001$	0.140625	0.28125	0.5625	1.125	2.25	4.5	9	NaN
$1,010$	0.15625	0.3125	0.625	1.25	2.5	5	10	NaN
$1,011$	0.171875	0.34375	0.6875	1.375	2.75	5.5	11	NaN
$1,100$	0.1875	0.375	0.75	1.5	3	6	12	NaN
$1,101$	0.203125	0.40625	0.8125	1.625	3.25	6.5	13	NaN
$1,110$	0.21875	0.4375	0.875	1.75	3.5	7	14	NaN
$1,111$	0.234375	0.46875	0.9375	1.875	3.75	7.5	15	NaN

Représentation des nombres en machine

Les additions peuvent très mal se passer !
En pratique, on peut se retrouver avec des situations où

$$(1 \oplus \varepsilon) - 1 = 0!$$

pour $\varepsilon \leq 6.10^{-8}$ (simple), 1.10^{-16} (double) et 1.10^{-34} (quadruple précision).

Conséquence directe : attention avec les séries !

Opérations en machine

Seules $\oplus$ et $\otimes$ sont câblées.
Comment faire une racine carrée ? On peut utiliser l'algorithme d'Héron d'Alexandrie en itérant :

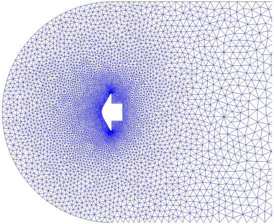
$$x_{k+1} = 0.5\left(x_k + \frac{a}{x_k}\right)$$

Il faut savoir faire la division que l'on peut obtenir en itérant :

$$x_{k+1} = x_k(2 - ax_k)$$

Un maillage

La plupart des méthodes numériques demandent de mailler le domaine. On établit alors des relations entre les valeurs approchées sur chaque maille $\rightarrow$ système linéaire de grande taille.



Exemple d'un maillage non structuré en 2D.

Un problème d'algèbre linéaire

On souhaite résoudre le système linéaire :

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_1 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_1 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2 \\ \vdots &= \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_1 + \cdots + a_{nn}x_n &= b_n \end{aligned}$$

que l'on peut ré-écrire :

$$Ax = b.$$

On se place dans des cas où $n \gg 1$ (typiquement entre 10^4 et 10^9).

On peut être amené à devoir résoudre ce type de système un nombre élevé de fois au cours d'une simulation numérique.

Une mauvaise méthode

Formellement, la solution est donnée par $x = A^{-1}b$.
Or, on peut explicitement calculer A^{-1} en utilisant la formule :

$$A^{-1} = \frac{1}{det(A)} \mathrm{Com}(A)^{\top}.$$

Problème : le calcul de A^{-1} par cette méthode requiert $\mathcal{O}((n+1)!)$ opérations.
Pour $n = 29$ et à raison de 10^{15} flops, il faut donc plus de 8 milliards d'années pour obtenir le résultat !

Remarques

- Le coût de la méthode de Cramer est similaire.
- Le calcul $A^{-1}b$ coûte $2n^2$ opérations.

Conclusion

- Le calcul scientifique est devenu l'un des piliers de la recherche
- Grâce à l'essort de l'informatique, il devient accessible y compris à des PME
- La résolution de cas très complexes (ex : météo) est encore hors de portée
- Pour obtenir des méthodes performantes, il faut faire des maths (non triviales)

Merci de votre attention !